

## КРИТИЧЕСКАЯ ТЕМПЕРАТУРА ВЕЩЕСТВА

Путинцев Д. Н.

Мурманский государственный технический университет

Актуальной задачей теории конденсированного состояния является определение энергии эффективного парного потенциала ( $D^*$ ) и нахождение взаимосвязей между структурными и энергетическими параметрами вещества. Величина энергии  $D^*$  может быть отсчитана от дна потенциальной ямы  $D_e^*$  или от энергии нулевого квантового уровня  $D_0^*$   $\{ D_e^* = (U_{вз} + |E_0|)/n^*, D_0^* = U_{вз}/n^* \}$ , где  $|E_0|$  - часть энергии связи, скомпенсированная энергией нулевых колебаний ( $E_0$ );  $n^*$  - эффективное число межмолекулярных связей, приходящееся на одну молекулу;  $U_{вз}$  - внутренняя энергия взаимодействия вещества [1]. У молекул инертных газов, образующих плотноупакованные структуры (в кристаллах  $Z=12$ ),  $n^*$  равно  $Z/2=6$ , где  $Z$  - число ближайших соседей молекулы. По мнению авторов [2] конденсация неполярных веществ в жидкое и твердое состояния происходит под действием дисперсионного межмолекулярного взаимодействия, мерой преодоления которого является температура кипения ( $T_{кип}$ ). Данное предположение нуждается в уточнении, так как  $T_{кип}$  зависит от давления среды и поэтому не является характеристикой вещества. В работе [3] показано, что мерой теплового движения, необходимого для преодоления суммарного дисперсионного и индукционного взаимодействия, которое может быть названо «поляризационной» составляющей эффективного парного потенциала  $D_e^*$ , является «абсолютная температура кипения», т.е. критическая температура  $T_{кр}$  вещества. При этом основной результат работы может быть представлен соотношениями  $D_{е.пол}^* = RT_{кр}$  и  $(U_{вз} + |E_0|)_{пол} = n^* RT_{кр}$  которые позволяют выделять из общей энергии взаимодействия поляризационную составляющую и связывать между собой структурные и энергетические характеристики вещества.

1. Рудаков Е.С. Термодинамика межмолекулярного взаимодействия. Новосибирск: НГУ, 1968. 387 с.
2. Полинг Л., Полинг П. Химия. М.: Мир, 1978. 683 с.
3. Путинцев Н.М., Путинцев Д.Н. // ДАН. 2003. Т.388. №1. С. 78-80.